Extrait du Site du Centre de Calcul de l'Université de Bourgogne

https://haydn2005.u-bourgogne.fr/dsi-ccub/spip.php?article70

Documentation logiciels calcul et bureautique

- Site Public - Calcul -

Date de mise en ligne : lundi 2 juin 2008

Copyright © Site du Centre de Calcul de l'Université de Bourgogne - Tous droits réservés

Documentations du CCuB

Configuration de NX NoMachine

Utilisations des logiciels : choisir la version d'un logiciel et obtenir de l'aide

Visualisation graphique haute performance avec TurboVNC et VirtualGL

Introduction à Grid Engine (logiciel de batch)

Ancien mode emploi du cluster

Copier des données sur le cluster de calcul (mode déconnecté)

Services proposés

Services proposés

Historique

Langages de programmation et calcul parallèle

Fortran	Fortran, CernLib, ACML
Calcul parallèle	MPI et OpenMP
Java	
Perl	
Python	
Prolog	

Mode d'emploi : Compiler vos codes en Fortran, C/C++

Copyright © Site du Centre de Calcul de l'Université de Bourgogne

Calcul scientifique, Elements finis

Matlab	
Scilab	
Mathematica	
Castem	Méthode F.E.M. du CEA
Comsol	Femlab
Abaqus	
Isight	

Analyse de données, statistiques

Sas	
R	R Project for Statistical Computing

Calcul formel

Mathematica	
Maple	
Reduce	
Sage	
OpenAxiom	

Chimie, méthodes ab-initio

Gaussian (et Gaussview 3.0)	Modèlisation de systèmes moléculaires
Jaguar	Ab-Initio Electronic Structure Package
Gamess	General Atomic and Molecular Electronic Structure System

Copyright © Site du Centre de Calcul de l'Université de Bourgogne

VASP	Vienna Ab-Initio Simulation Package
Gromacs	GROningen MAchine for Chemical Simulations
Quantum Espresso	Electronic-structure calculations and materials modeling at the nanoscale
Nwchem	A chemistry software package which also includes quantum chemical and molecular dynamics functionality

Graphisme

Amira / Avizo	
Ovito	
VMD	
Xfig postscript-Xfig	
Povray	
OpenGL	
PgPlot	
XmGrace	
GNUPlot	
Matlab	
Fiji	Fiji is Just ImageJ

Climatologie

GRADS	traitement cartographique
Ferret	visualisation pour océanographes et météorologues
MM5	modele de climatologie
Netcdf	traitement de données sous forme de tableau
Pyclimate	outil pour l'analyse de varaibilités climatiques
NCO	netcdf operators

Copyright © Site du Centre de Calcul de l'Université de Bourgogne

Ncar	Ncar
NCL	NCL
Arpege-climat	Arpege-climat
WRF	Weather Research and Forecasting
WRF	Chimere

Bureautique - editeur de texte

LaTeX	traitement de texte scientifique
OpenOffice	logiciel de bureautique Open Source
Pdftk	manipulation de fichiers pdf
Gvim	
Nedit	
emacs	

Génétique

Migrate-n1	Migrate-n1
Structure	Structure

Divers

Benchmarks	linpack et specbenchs

Copyright © Site du Centre de Calcul de l'Université de Bourgogne